

## РАСЧЕТ ФАКТОРА ИЗВИЛИСТОСТИ ДЛЯ КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ LSM-YSZ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

*Фарленков А.С., Ананьев М.В.*

ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

620002 г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

ИВТЭ УрО РАН, 620990 г. Екатеринбург, ул. Академическая, 20

Разработано программное средство для расчета фактора извилистости методом Монте-Карло. Эта величина может быть пропорциональна коэффициенту газопроницаемости, электропроводности и коэффициенту диффузии (ионной проводимости) материала (согласно соотношению Нернста-Эйнштейна) [1]. Для расчета фактора извилистости методом Монте-Карло в интересующем объеме генерируются блуждающие частицы в количестве  $N$  штук. За один шаг работы программы каждая частица совершает  $n$  блужданий с заданной длиной блуждания  $L$ . После этого рассчитывается сумма среднеквадратичных смещений всех частиц заданного ансамбля. Данная процедура повторяется требуемое количество раз. Фактор извилистости определяется как отношение среднеквадратичного смещения частиц в пористой среде к среднеквадратичному смещению в свободном пространстве.

На примере сгенерированных с помощью алгоритма [2] моделей микроструктуры показано, что фактор извилистости зависит не только от пористости, но и от среднего диаметра частиц. Увеличение среднего диаметра приводит к уменьшению фактора извилистости при постоянной пористости.

Апробацию разработанного программного средства для расчета фактора извилистости производили на примере изучения параметров микроструктуры и электропроводности катодных материалов LSM-YSZ. Сопротивление композиционного материала уменьшается со временем при выдержке при  $T=800^{\circ}\text{C}$ ,  $P_{\text{O}_2}=10^{-2}$  атм в течение 1000 часов. Во время испытаний извлекались образцы-свидетели для анализа микроструктуры. Обнаружено, что факторы извилистости для фаз LSM и YSZ уменьшаются со временем, что коррелирует с ростом электропроводности исследуемого катодного материала. Анализ изображений показал, что в результате выдержки происходит диффузионное распространение фаз LSM и YSZ, приводящее к укрупнению частиц при неизменных линейных размерах самого образца. Образование более связной структуры фаз, входящих в состав композиционного материала приводит к снижению сопротивления и фактору извилистости как фазы LSM, так и YSZ.

Предложенный подход оказывается чрезвычайно полезным при анализе изменения свойств материалов, которые по тем или иным причинам сложно напрямую измерить. Применение разработанного программного средства позволяет оценивать транспортные свойства функциональных электрохимических материалов, исходя из параметров микроструктуры.

[1] Iwai H., etc // Journal of Power Sources, No 195, 2010, 955—961.

[2] Ананьев М.В., Гаврилюк А.Л. // Тез. 42-й Всеросс. мол. школы-конференции «Совр. пробл. мат-ки», Екатеринбург, 30 янв. — 6 фев. 2011, с. 276—279.

*Авторы выражают благодарность Поротниковой Н.М., Ерёмину В.А., Медведеву Д.А. и Панкратову А.А. за предоставление экспериментальных данных, на основе которых проводилось моделирование.*